|  |  |
| --- | --- |
| VIDA GYÖRGY JÓZSEF  Fizikus MSc MSc, 3. félév  Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Természettudományi Kar |  |

Témavezető:

|  |
| --- |
| Dr. Szunyogh László  egyetemi tanár, BME TTK |

Effective spin models based on ab initio calculations

A mágneses jelenségek gyakorlati felhasználásának egyik kiemelt területe a nagy sűrűségű mágneses adattárolás és a mágneses szenzorok, ahol az egyre kifinomultabb megoldásokhoz elengedhetetlen a felhasznált anyagok mágneses tulajdonságainak mikroszkopikus szinten történő megértése. Számítógépes szimulációkat széles körben alkalmaznak a mágnesség vizsgálatára. A térben és időben nagy skálájú számítások elvégzése ab initio módszerekkel nem reális lehetőség, ezért a legtöbb esetben valamely alkalmas spin-modell használatára van szükség. A TDK munka keretében egy gyakorlati szempontból fontos rendszer esetében vizsgáljuk, hogyan érdemes a modell paramétereit úgy származtatni, hogy az a rendszer mágneses tulajdonságait minél pontosabban írja le.

A FePt rendezett mágneses ötvözet sajátossága. hogy a Pt atomok ún. indukált momentumokkal rendelkeznek, mely erősen függ a Fe atomok spin-konfigurációjától. Ilyen esetekben a Heisenberg modellben szereplő kicserélődési kölcsönhatásra a Liechtenstein és munkatársai által [1] levezett formula nem alkalmazható. Az irodalomban több próbálkozás született arra, hogy a stabil momentumok (Fe) kölcsönhatásaiban az indukált momentumok (Pt) képződési energiáját is figyelembe vegyék [2,3].

Dolgozatomban röviden áttekintem ezeket az elméleti megközelítéseket. A sűrűségfunkcionál elméleten alapuló Korringa–Kohn–Rostoker-módszerrel [4] elektronszerkezet számításokat végzünk a FePt rendezett mágneses ötvözetre. A KKR számítások alapján származtatom a spin-modellhez szükséges fizikai mennyiségeket: a kicserélődési kölcsönhatásokat az Fe spinek között, a Pt momentum képződési energiáját és spin-szuszceptibilitását. Az így kapott spin-modellekkel véges hőmérsékletű spin-dinamika számításokat végeztem és kiszámítottam a vas mágnesezettségének hőmérsékletfüggését és a Curie-hőmérsékletet. A kapott szimulációs eredmények kísérleti adatokkal való összevetéséből próbálunk következtetést levonni az irodalomban javasolt modellek alkalmazhatóságára vonatkozóan.

Irodalom:

[1] A. I. Liechtenstein et al., Jurn. of Magn. and Magn. Mater., Vol. 67, p. 65-74. (1987).

[2] O. N. Mryasov., Phase Transitions, Vol. 78 (1-3):197-208 (2005).

[3] M. Lezaic, Ph. Mavropoulos, G. Bihlmayer, and S. Blügel, ArXiv:1210.2375 (2012).

[4] J. Zabloudil, R. Hammerling, L. Szunyogh, and P. Wienberger, "Electron Scattering in Solid Matter: A Theoretical and Computational Treatise", Springer (2005).